相分離系の「双極能率」保存と構造関数のq^4則(長期研究会「パターン形成、運動およびその統計」,研究会報告)

冨田, 博之

相分離系の「双極能率」保存と構造関数のq^4則

京都大学教養部　冨田博之

相分離の後期過程すなわちスケイリング域における構造関数の形については長年にわたって議論が行われてきたが，最近，波数の小さい領域でのq依存性が問題になっている．後期過程における相分離系は，明確な界面で構成されるランダムパターン系であり，波数の大きい領域の性質が局所的統計性たとえば界面の曲率の平均で決まるのに対し，波数の小さい領域の性質は界面系の大域的統計性から決まる．たとえば，秩序変数を $s(\mathbf{r})$，その空間的平均および揺らぎを $\overline{s}$，$\rho(\mathbf{r})=s(\mathbf{r})-\overline{s}$ とするとき，保存則

$$\int \rho(\mathbf{r})dV=0 \tag{1}$$

により構造関数

$$S(\mathbf{q})=\int dV\exp(i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r})[(1/V)\int dV_1\rho(\mathbf{r}_1)\rho(\mathbf{r}_1+\mathbf{r})] \tag{2}$$

に対してよく知られた条件

$$S(0)=(1/V)(\int \rho(\mathbf{r})dV)^2=0 \tag{3}$$

が要請される．$S(\mathbf{q})$を波数ベクトル$\mathbf{q}$の方向について平均してからqについて展開した最低次の項は保存則(1)を用いて以下のように変形される．

$$-(q^2/4)(1/V)\int\int(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2)^2\rho(\mathbf{r}_1)\rho(\mathbf{r}_2)dV_1dV_2$$

$$=(q^2/2)(1/V)(\int \mathbf{r}\rho(\mathbf{r})dV)^2 \tag{4}$$

ここで

$$\mathbf{p}=\int \mathbf{r}\rho(\mathbf{r})dV \tag{5}$$

は，$\rho(\mathbf{r})$を大域的に中性の電荷分布とみれば双極能率であるが，これを全体の体積Vで割った量は

$$\mathbf{P}=(1/V)\int \mathbf{r}\rho(\mathbf{r})dV$$

$$=2\phi(1-\phi)\ [(\int \mathbf{r}\rho_+dV/\int\rho_+dV)-(\int \mathbf{r}\rho_-dV/\int\rho_-dV)] \tag{6}$$

となり，＋部分，－部分各々の重心位置を結ぶベクトルであって，分布の異方性を表す量であると考えてよい．ここで $\phi=(1+\overline{s})/2$ は体積組成比であり

$$\rho_+ = 1 - \bar{s} = 2(1-\phi) \qquad \rho_- = 1 + \bar{s} = 2\phi$$

である．したがって，等方的なパターンではこのPはマクロな量にはならず，構造関数の波数展開の最低次q^2の項は現われないと考えられる．次の項q^4の係数は４重極能率テンソル $\{Q_{ab}\}$ と関係づけられるが，たとえば TrQ はスカラー量であって大域的に等方的な系であっても消えず，実際，典型的なパターンを作って調べればq^4の係数は特徴的なクラスタサイズの４乗になることが示される．

一方，保存系の現象論的動力学では，適当な境界条件を選べば双極能率 **p** は保存量であることが以下のように示される．

$$\partial\rho/\partial t = -\nabla\cdot\mathbf{j} \qquad \mathbf{j} = -L\nabla\mu$$

より

$$d\mathbf{p}/dt = -\int \mathbf{r}\,(\nabla\cdot\mathbf{j})\,dV$$

$$= -\oint_{\text{境界}} [\,(\mathbf{j}\cdot\mathbf{n})\,\mathbf{r} + L\mu\,\mathbf{n}\,]\,dS$$

第２項の表面積分は，通常のように十分大きな系では体積積分に対して無視できるが，第１項は **r** が掛かっているためそうはいかず，周期境界条件では無視できない．しかしながら実際の物質的境界条件でそうであるように，表面での物質流 $\mathbf{j}\cdot\mathbf{n}=0$ とおける自然境界条件では $\mathbf{p}=\text{constant}$ となり，初期状態が等方的（$\mathbf{p}=0$）であれば等方性は保存されることになる．大野たちのセルダイナミックスの方法は，熱的揺動項のないラプラシアン動力学系をシミュレートしたものであり，境界条件について疑問が残るが，この方法を用いてC. Yeungが報告しているq^4則は，以上の議論で説明できると考えられる．カイネティックイジングモデルでは必然的に揺らぎが入るからこうはいかず，素過程が隣接する＋－対すなわち基本双極子の反転であるから，**p** は運動学的保存量ではなくてブラウン運動的に変化することが予想される．以下の図は６４×６４の２次元系で計算機シミュレイションによりこのことを調べた結果である．＋－部分の重心位置を結ぶベクトル**P**は，初期の完全にランダムな配置では期待値$\overline{P^2}=1/3$であるが，相分離の特性長が格子定数の１０倍以上になってもまだ１の程度にとどまったまま，ブラウン運動的な変化を示している．周期的境界条件の場合，$\mathbf{j}\cdot\mathbf{n}=0$すなわち孤立的境界条件の場合に比べて変動が激しいのは，上の現象論で検討したことと関連しているであろう．特性長としては界面の面積すなわち＋－対の総数を求め，その逆数を採用した．いずれの境界条件に対してもほぼ一致して系統的に増加するが，実験の範囲内ではまだ $t^{1/3}$ 則は見られない．

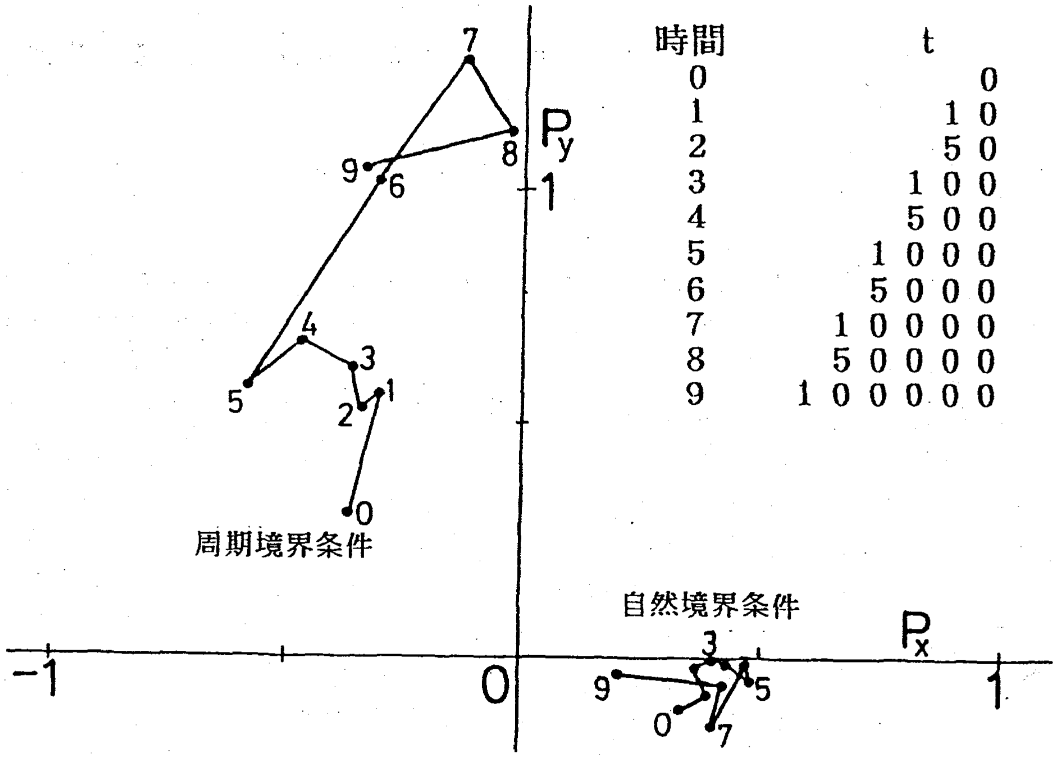

図1　双極能率（＋－部分の重心位置間のベクトル）**P**

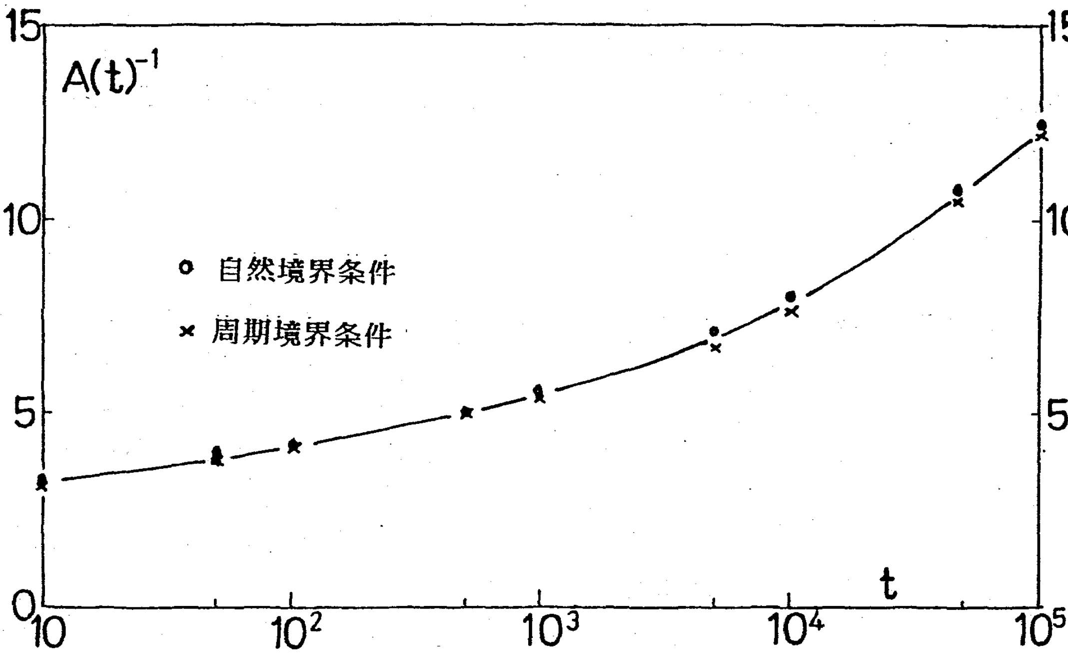

図2　特性長（単位面積あたりの界面長の逆数）$A(t)^{-1}$